

(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES
PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum
Internationales Büro



(43) Internationales Veröffentlichungsdatum
6. Mai 2005 (06.05.2005)

PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2005/040249 A1

(51) Internationale Patentklassifikation⁷: C08G 77/20,
77/22, C07F 7/18

ZUR FÖRDERUNG DER ANGEWANDTEN
FORSCHUNG E.V. [DE/DE]; Hansastrasse 27c, 80686
München (DE).

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2004/012035

(72) Erfinder; und

(22) Internationales Anmeldedatum:
25. Oktober 2004 (25.10.2004)

(75) Erfinder/Anmelder (nur für US): WOLTER, Herbert
[DE/DE]; Stauferring 78, 97941 Tauberbischofsheim
(DE).

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(74) Anwälte: LEONHARD OLGEMÖLLER FRICKE
usw.; Postfach 10 09 62, 80083 München (DE).

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(81) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für
jede verfügbare nationale Schutzrechtsart): AE, AG, AL,
AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH,
CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES,
FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE,

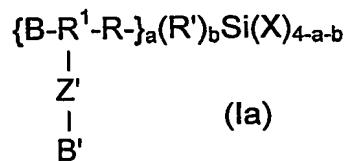
(30) Angaben zur Priorität:
103 49 766.8 24. Oktober 2003 (24.10.2003) DE

(71) Anmelder (für alle Bestimmungsstaaten mit Aus-
nahme von US): FRAUNHOFER-GESELLSCHAFT

[Fortsetzung auf der nächsten Seite]

(54) Title: SILANE AND SILICIC ACID POLYCONDENSATES WITH RADICALS CONTAINING BRANCHED-CHAIN URETHANE, ACID AMIDE AND/OR CARBOXYLIC ACID ESTER GROUPS

(54) Bezeichnung: SILANE UND KIESELSÄUREPOLYKONDENSATE MIT VERZWEIGTKETTIGEN, URETHAN-, SÄUREAMID- UND/ODER CARBONSÄUREESTERGRUPPENHALTIGEN RESTEN



(57) **Abstract:** The invention relates to silane of formula (Ia), wherein the radicals and indices have the following meaning: R is an alkylene, arylene or alkylenearylene group that can be interrupted by one or more oxygen or sulfur atoms or carboxyl or amino groups or can carry said atoms/groups on their ends opposite the silicon atom; R¹ is a Z'-substituted alkylene, arylene or alkylenearylene group, which can be interrupted by one or more oxygen or sulfur atoms or carboxyl or amino groups or can carry said atoms/groups on one of their ends; R' is an alkyl, alkenyl, aryl, alkylaryl or arylalkyl group; B and B' can be identical or

different, both radicals can have the meaning of a straight-chained or branched organic group with at least one C=C double bond and at least 2 carbon atoms; B' can mean instead thereof but also -R²Si(OR³)_{4-a} or -R²R'_bSi(OR³)_{4-a-b}, wherein R² is an alkylene group and R' has the meaning defined above; X represents a group that can enter into a hydrolytic while forming Si-O-Si bridges; Z' means -NH-C(O)O-, -NH-C(O)- or -CO(O)-, wherein the first two radicals are bonded to radical B' by means of the NH group, whereas the carboxylate group can point in both directions except for a minor exception; a represents 1 or 2, and b is 0 or 1. The invention also relates to silicic acid poly (partial) condensates which can be produced by hydrolysis and condensation of said silane, and to the polymer materials with or without filling materials produced therefrom. The invention further relates to a method for the production of the inventive silane.

WO 2005/040249 A1

(57) **Zusammenfassung:** Die vorliegende Erfindung betrifft Silan der nachstehenden Formel (Ia), worin die Reste und Indices die folgende Bedeutung haben: R ist eine Alkyl-, Aryl- oder Alkylenearylengruppe, die durch eine oder mehrere Sauerstoff- oder Schwefelatome oder Carboxyl- oder Aminogruppen unterbrochen sein oder solche Atome/Gruppen an ihrem dem Siliciumatom abgewandten Ende tragen kann; R¹ ist eine mit Z' substituierte, Alkyl-, Aryl- oder Alkylenearylengruppe, die durch eine oder mehrere Sauerstoff- oder Schwefelatome oder Carboxyl- oder Aminogruppen unterbrochen sein oder solche Atome/Gruppen an einem ihrer Enden tragen kann; R' ist eine Alkyl-, Alkenyl-, Aryl-, Alkylaryl- oder Arylalkylgruppe; B und B' können gleich oder verschieden sein, beide Reste können die Bedeutung einer geradkettigen oder verzweigten organischen Gruppe mit mindestens einer C=C-Doppelbindung und mindestens 2 Kohlenstoffatomen haben, B' kann statt dessen aber auch -R²Si(OR³)_{4-a} oder -R²R'_bSi(OR³)_{4-a-b} bedeuten, worin R² eine Alkylengruppe und R' wie oben definiert ist; X ist eine Gruppe, die unter Ausbildung von Si-O-Si-Brücken eine hydrolytische Kondensationsreaktion eingehen kann; Z' hat die Bedeutung -NH-C(O)O-, -NH-C(O)- oder -CO(O)-, wobei die beiden erstgenannte Reste über die NH-Gruppe am Rest B' gebunden sind, während die Carboxylatgruppe mit einer kleinen Ausnahme in beide Richtungen weisen kann; a bedeutet 1 oder 2, und b ist 0 oder 1. Die Erfindung betrifft weiterhin Kieseläurepoly(teil)kondensate, die sich durch Hydrolyse und Kondensation dieser Silane erzeugen lassen, sowie daraus hergestellte Polymermassen mit oder ohne Füllstoffe. Und schließlich stellt die Erfindung Verfahren zur Herstellung der erfundungsgemäßen Silane bereit.



KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.

(84) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare regionale Schutzrechtsart): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

Erklärung gemäß Regel 4.17:

— *Erfindererklärung (Regel 4.17 Ziffer iv) nur für US*

Veröffentlicht:

— *mit internationalem Recherchenbericht*
— *vor Ablauf der für Änderungen der Ansprüche geltenden Frist; Veröffentlichung wird wiederholt, falls Änderungen eintreffen*

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.